



Méthodes de quadrature multi-dimensionnelles et décomposition en polynômes de chaos Application à la quantification d'incertitude et aux méthodes stochastiques d'analyse de sensibilité

Alexandre Janon

► To cite this version:

Alexandre Janon. Méthodes de quadrature multi-dimensionnelles et décomposition en polynômes de chaos Application à la quantification d'incertitude et aux méthodes stochastiques d'analyse de sensibilité. 2010. hal-00730256

HAL Id: hal-00730256

<https://inria.hal.science/hal-00730256>

Preprint submitted on 8 Sep 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Méthodes de quadrature multi-dimensionnelles et décomposition en polynômes de chaos

Application à la quantification d'incertitude et aux
méthodes stochastiques d'analyse de sensibilité

Alexandre Janon ¹

Novembre 2010

Table des matières

1	Contexte	2
2	Méthodes de quadrature multidimensionnelle	4
2.1	Monte-Carlo	4
2.1.1	Principe	4
2.1.2	Vitesse de convergence	4
2.1.3	Intervalle de confiance	5
2.1.4	Echantillonnage par hypercubes latins	6
2.2	Quasi Monte-Carlo	7
2.2.1	Principe de la méthode	8
2.2.2	Construction d'une suite à discrépance faible	9
2.2.3	Estimation d'erreur et randomisation	10
2.3	Produit tensoriel de Smolyak	11
2.3.1	Généralités sur les formules de quadrature	12
2.3.2	Méthode de Smolyak	13
2.3.3	Méthodes emboîtées et estimation d'erreur	14

1. Laboratoire Jean Kuntzmann, Université Grenoble 1/INRIA,
<mailto:alexandre.janon@imag.fr>.

3 Méthodes basées sur la décomposition en polynômes de chaos	15
3.1 Décomposition en polynômes de chaos	15
3.2 Approche par projection	18
3.3 Approche par régression	19
3.3.1 Principe	19
3.3.2 Indicateurs d'erreur	19
3.4 Approche Galerkin	21
3.4.1 Principe de la méthode	21
3.4.2 Réduction a priori par GSD	25
4 Application aux indices de sensibilité	26
4.1 Calcul par quadrature	26
4.2 Calcul à partir de la décomposition en polynômes de chaos . . .	29

1 Contexte

Considérons la sortie Y d'un modèle. Cette sortie est fonction des paramètres X_1, \dots, X_p d'entrée de ce modèle :

$$Y = f(X_1, \dots, X_p)$$

Cette sortie est supposée scalaire, les sorties multiples pouvant étant traitées une par une.

Nous nous plaçons dans un cas où connaissance des paramètres d'entrée est imparfaite, et nous modélisons cette connaissance partielle par l'attribution d'une loi de probabilité au vecteur des entrées $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$, qui est ainsi une variable aléatoire sur un espace probabilisé (Ω, \mathcal{F}, P) . Pour une fonction f \mathcal{F} -mesurable, la sortie Y devient à son tour une variable aléatoire, dont la loi est l'image par f de la loi de \mathbf{X} .

On suppose que f est une fonction L^2 , et on s'intéresse alors au calcul des deux résumés statistiques suivants :

$$\mathbb{E}(Y) = \int_{\Omega} f(\mathbf{X}) d\mathbf{X}(P)$$

et

$$\text{Var}(Y) = \int_{\Omega} f(\mathbf{X})^2 d\mathbf{X}(P) - \left(\int_{\Omega} f(\mathbf{X}) d\mathbf{X}(P) \right)^2$$

Le premier donne la sortie moyennée sur les réalisations possibles de l'aléa (ie. les valeurs possibles pour les paramètres d'entrées), chaque réalisation étant pondérée par sa probabilité de réalisation ; le second donne la dispersion typique des réalisations de la sortie autour de cette moyenne, et traduit quantitativement comment la variabilité de \mathbf{X} entraîne la variabilité de $f(\mathbf{X})$. Lorsque les paramètres d'entrées X_1, \dots, X_p sont stochastiquement indépendants, on s'intéresse également aux indices de sensibilité (principaux, du premier ordre), définis comme suit :

$$S_i = \frac{\text{Var}E(Y|X_i)}{\text{Var}Y} \quad \text{pour } i = 1, \dots, p$$

L'indice S_i donne la part de variance de Y expliquée par la variation de l'entrée X_i seule, ramenée à la variance totale de Y .

La fonction f est souvent la sortie d'un code complexe, par exemple une fonctionnelle de la solution approchée d'une EDP calculée par une méthode de différences finies ou d'éléments finis. Ceci entraîne qu'une expression analytique simple de f n'est en général pas disponible, et ainsi un calcul analytique exact des indicateurs statistiques écrits plus haut n'est pas possible et que ceux ci doivent être approchés à l'aide de méthodes numériques (dites "*boite noire*") ne requérant que l'évaluation de $f(\mathbf{X})$ pour un nombre fini de valeurs de \mathbf{X} – bien qu'il existe des méthodes (dites *intrusives*) faisant des suppositions sur la "forme" de f . Par ailleurs, le temps de calcul nécessaire à l'évaluation de $f(\mathbf{X})$, pour une valeur de \mathbf{X} , peut être important. Il est donc utile de choisir une méthode d'approximation numérique qui minimise le nombre d'évaluations nécessaires, et/ou d'utiliser un métamodèle (par exemple à l'aide d'une surface de réponse ou d'une réduction de modèle par base réduite), permettant de diminuer le coût d'une évaluation de la fonction f .

Dans les sections 2 et 3, nous nous intéressons au calcul de $E(Y)$ et de $\text{Var}(Y)$; la section 2 traite des méthodes directes, basées sur l'écriture de ces quantités en tant qu'intégrales, la section 3 définit la décomposition en polynômes de chaos de Y , indique comment calculer cette décomposition et l'utiliser pour approcher les quantités d'intérêt. La section 4, enfin, donne comment utiliser les techniques des sections 2 et 3 pour le calcul approché des indices de sensibilité S_i .

2 Méthodes de quadrature multidimensionnelle

Quitte à remplacer f par son carré, nous voyons que le calcul de $\text{Var}(f(\mathbf{X}))$ se ramène à celui de $\mathbf{E}(f(\mathbf{X}))$. Ainsi, les méthodes que nous allons décrire dans cette section sont donc toutes dirigées vers le calcul approché de $\mathbf{E}(f(\mathbf{X}))$.

Notre référence pour les sections 2.1 et 2.2 est [15].

2.1 Monte-Carlo

2.1.1 Principe

Dans la méthode de Monte-Carlo, on tire de manière indépendante un échantillon $(\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N)$ de N réalisations de la loi de \mathbf{X} , et l'on approche l'espérance de f par la moyenne empirique de f évaluée sur cet échantillon :

$$\mathbf{E}(f(\mathbf{X})) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}^i)$$

La seule contrainte pratique est donc que la loi de \mathbf{X} soit simulable.

2.1.2 Vitesse de convergence

Analysons maintenant la vitesse de convergence de cette méthode. Notons

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}^i)$$

$(M_N)_N$ est une suite de variables aléatoires, fonctions de l'échantillon aléatoire $(\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N)$.

Notons également $m = \mathbf{E}(f(\mathbf{X}))$ la quantité à estimer. Compte tenu de la nature probabiliste de la méthode de Monte-Carlo, nous considérons un critère d'erreur analysant le comportement "moyen" de cette méthode, la moyenne étant prise sur tous les choix possibles de N -échantillons $(\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N)$. Un tel critère est la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) :

$$RMSE = \sqrt{\mathbf{E}((M_N - m)^2)}$$

On a :

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left((M_N - m)^2 \right) &= \mathbf{E} \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^i) f(\mathbf{X}^j) - 2 \frac{m}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}^i) + m^2 \right) \\ &= \frac{1}{N^2} \left(N \mathbf{E} \left(f(\mathbf{X})^2 \right) + (N^2 - N) m^2 \right) - 2 \frac{m^2}{N} + m^2 \\ &= \frac{\mathbf{E} \left(f(\mathbf{X})^2 \right) - m^2}{N} = \frac{\text{Var} f}{N} \end{aligned}$$

D'où :

$$RMSE = \sigma(f) N^{-1/2}$$

où $\sigma^2(f) = \text{Var} f$.

La méthode est donc convergente en moyenne quadratique (donc aussi en moyenne absolue ; et on peut montrer, à l'aide de la loi forte des grands nombres, qu'elle l'est presque sûrement).

2.1.3 Intervalle de confiance

On peut également construire un intervalle de confiance approché pour m : d'après le théorème limite centrale, on a :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} P \left(m - \frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}} h \leq M_N \leq m + \frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}} h \right) = 2\Phi(h) - 1 \quad \forall h > 0$$

où $\Phi(h) = \int_{-\infty}^h \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} dt$ est la fonction de répartition d'une variable aléatoire normale centrée réduite.

En considérant que N est suffisamment grand (en pratique $N > 30$ suffit) pour que :

$$P \left(m - \frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}} h \leq M_N \leq m + \frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}} h \right) \approx 2\Phi(h) - 1,$$

un intervalle de confiance approché de risque $\alpha \in]0; 1[$ pour m est alors donné par :

$$\left[\hat{m} - \frac{\hat{s}}{\sqrt{N}} h_\alpha; \hat{m} + \frac{\hat{s}}{\sqrt{N}} h_\alpha \right]$$

où :

$$\hat{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}^i)$$

est l'estimateur Monte Carlo de m ,

$$\hat{s} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}^i)^2 - \hat{m}^2}$$

est l'estimateur Monte Carlo de $\sigma(f)$, et $h_\alpha > 0$ est tel que :

$$2\Phi(h_\alpha) - 1 = 1 - \alpha \quad (1)$$

On constate que la vitesse de décroissance de la largeur de l'intervalle de confiance est également en $N^{-1/2}$, en accord avec l'analyse du RMSE faite plus haut. Cette vitesse en $N^{-1/2}$ a pour inconvénient d'être assez lente (et de décélérer lorsque N augmente). Cependant elle est indépendante de la dimension (le nombre de paramètres d'entrée p) et est atteinte en supposant seulement f de carré intégrable.

2.1.4 Échantillonnage par hypercubes latins

L'échantillonnage par hypercubes latins est une méthode de génération de l'échantillon aléatoire qui permet d'améliorer l'efficacité de la méthode de Monte-Carlo. Elle requiert que les variables X_1, \dots, X_p soient indépendantes.

Présentons d'abord le cas où toutes les X_i suivent une loi uniforme sur $[0; 1]$. Pour générer un échantillon iid du vecteur (X_1, \dots, X_p) de taille N , on commence par diviser l'hypercube $[0; 1]^d$ en N^d pavés :

$$\mathcal{P}_{i_1, \dots, i_d} = \prod_{j=1}^d \left[\frac{i_j}{N}; \frac{i_j + 1}{N} \right]$$

pour $(i_1, \dots, i_d) \in \{0, 1, \dots, N-1\}^d$.

On choisit aléatoirement d permutations π_1, \dots, π_d de $\{0, 1, \dots, N-1\}$, en effectuant d tirages indépendants sans remise dans $\{0, 1, \dots, N-1\}$. Enfin, pour $k = 1, \dots, N$, on génère le k ème point de l'échantillon en choisissant uniformément un point dans le pavé $\mathcal{P}_{\pi_1(k), \pi_2(k), \dots, \pi_d(k)}$.

Par rapport à un échantillonnage purement iid donné par un Monte-Carlo classique, l'échantillonnage par hypercubes latins possède la propriété suivante : si un point de l'échantillon appartient à un pavé $\mathcal{P}_{i_1, \dots, i_d}$, alors aucun point de l'échantillon n'est présent dans aucun des pavés "alignés" $\mathcal{P}_{j_1, \dots, j_d}$ pour (j_1, \dots, j_d) tel qu'il existe $s \in \{1, \dots, d\}$ tel que $i_s = j_s$. Cela présente l'avantage de "mieux

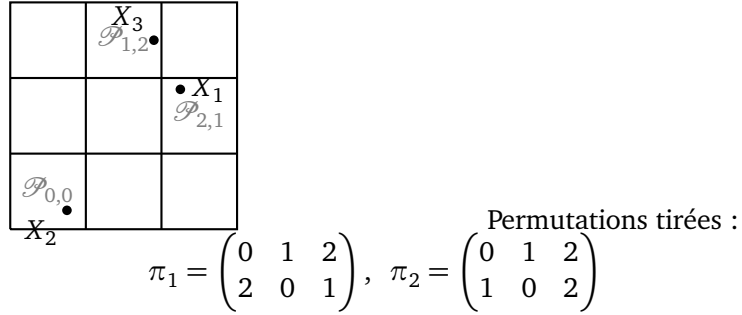


FIGURE 1 – Exemple d'échantillonnage, en dimension $d = 2$, pour $N = 3$

remplir" l'espace et d'éviter les "concentrations" observées dans les plans Monte-Carlo classiques.

Si les lois des $(X_i)_{i=1,\dots,d}$ ne sont pas uniformes dans $[0; 1]$, désignons par U_k le k ème point de $[0; 1]^d$ obtenu lors d'un échantillonnage par hypercubes latins d'une loi uniforme sur $[0; 1]^d$ et par F_i la fonction de répartition de X_i (pour $i = 1, \dots, d$). Nous obtenons le k ème point de l'échantillonnage de la loi des (X_i) comme le point de \mathbf{R}^d donné par :

$$(F_1^{-1}(U_k), F_2^{-1}(U_k), \dots, F_d^{-1}(U_k))$$

2.2 Quasi Monte-Carlo

Nous supposons que l'on peut écrire $\mathbf{E}(Y)$ comme intégrale sur un hypercube unité :

$$\mathbf{E}(Y) = \int_{[0;1]^d} g$$

où $g : \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}$ est une fonction intégrable.

Une telle écriture s'obtient très souvent à l'aide d'un changement de variables. Par exemple, si $p = 1$ et que $Y = f(X_1)$ et que X_1 suit une loi uniforme sur $[1; 4]$, on a :

$$\mathbf{E}(Y) = \int_1^4 f(x)dx = \int_0^1 3f(3x' + 1)dx'$$

par le changement de variable $x' = (x - 1)/3$.

Un autre exemple est le suivant : soit $p = 2$, $Y = f(X_1, X_2)$, où X_1 et X_2 sont

deux variables aléatoires indépendantes, normales centrées réduites. On a :

$$\mathbf{E}(Y) = \int_{\mathbf{R}^2} f(z, t) \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{z^2 + t^2}{2}\right) dz dt = \int_0^1 \int_0^1 f\left(\sqrt{-2 \ln u} \cos(2\pi v), \sqrt{-2 \ln u} \sin(2\pi v)\right) du dv$$

par la transformation de Box-Müller :

$$\begin{cases} z = \sqrt{-2 \ln u} \cos(2\pi v) \\ t = \sqrt{-2 \ln u} \sin(2\pi v) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} u = \exp\left(-\frac{z^2 + t^2}{2}\right) \\ v \text{ est l'unique élément de } [0; 1] \text{ tel que } \begin{cases} \cos(2\pi v) = z / \sqrt{z^2 + t^2} \\ \sin(2\pi v) = t / \sqrt{z^2 + t^2} \end{cases} \end{cases}$$

2.2.1 Principe de la méthode

Une méthode de quasi Monte-Carlo est la spécification (indépendante de g) d'une suite de points $(x_i)_{i \in \mathbf{N}^*} \subset [0; 1]^d$ donnant lieu aux approximations :

$$\int_{[0;1]^d} g \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \quad (2)$$

pour tout $N \in \mathbf{N}^*$.

Remarquons qu'avec cette définition, la suite (x_i) est également indépendante de N . Cette propriété confère à cette méthode une propriété d'*adaptativité* : on peut calculer une approximation de $\int g$ en prenant $N = N_0$ pour une certaine valeur de N_0 , puis, si nécessaire, raffiner cette approximation en choisissant $N = N_1 > N_0$, en calculant seulement $N_1 - N_0$ valeurs de la fonction g aux points rajoutés $x_{N_0+1}, \dots, x_{N_1}$. La méthode de Monte-Carlo présentée plus haut présente également cette propriété.

Une analyse de l'erreur d'une méthode de quasi Monte-Carlo est donnée par l'inégalité de Koksma-Hlawka :

$$\left| \int g - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \right| \leq V(g) D^* (\{x_1, \dots, x_n\}) \quad (3)$$

où $V(g)$ est la *variation de Hardy-Krause* de g (c'est un nombre indépendant

du choix de $\{x_i\}$ et $D^*(A)$ désigne la *discrépance* (étoilée) de A :

$$D^*(A) = \sup_P \left| \frac{\#(A \cap P)}{\#A} - \lambda(P) \right|$$

où λ désigne la mesure de Lebesgue sur $[0; 1]^d$ et où le sup est pris sur les pavés P de la forme $\prod_{j=1}^d [0; a_j]$ pour $0 < a_j \leq 1$. Le nombre $D^*(A)$ donne donc l'erreur maximale commise lors de l'approximation du volume d'un tel pavé par la proportion de points de A qui sont dans P .

Le nombre $V(g)$ étant imposé par la fonction à intégrer, il est intéressant de choisir une suite de points $\{x_i\}$ ayant la discrépance la plus faible possible, afin de minimiser la borne donnée par l'inégalité de Koksma-Hlawka. Il est conjecturé qu'il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de la dimension d , telle que toute suite $\{x_i\}$ satisfait :

$$D^*(\{x_1, \dots, x_N\}) \geq C \frac{(\ln N)^d}{N} \quad \forall N \in \mathbf{N}^* \quad (4)$$

On appelle donc *suite à discrépance faible* une suite réalisant cet optimum conjecturé, à la constante C près. En d'autres termes, on dit que $\{x_i\} \subset [0; 1]^d$ est à discrépance faible si il existe $C > 0$ vérifiant (4).

Le terme de méthode de quasi Monte-Carlo est en général réservé aux approximations (2) lorsque (x_i) est une suite à discrépance faible.

2.2.2 Construction d'une suite à discrépance faible

Suites de Van der Corput Soit un entier $b \geq 2$. Pour $i \geq 1$, on définit le i ème terme de la suite de Van der Corput en base b comme le réel défini comme suit :

$$C_i^{(b)} = \sum_{k=1}^K \frac{d_k^{(b)}(i)}{b^k}$$

où $d_K^{(b)}(i) \dots d_2^{(b)}(i) d_1^{(b)}(i)$ est l'écriture de i en base b .

Autrement dit, $C_i^{(b)}$ est obtenu en renversant l'écriture en base b de i , en incluant le séparateur "décimal". Par exemple, les premiers termes de la suite de Van der Corput en base 10 sont :

$$0.1, 0.2, 0.3, \dots, 0.9, 0.01, 0.11, 0.21, 0.31 \dots$$

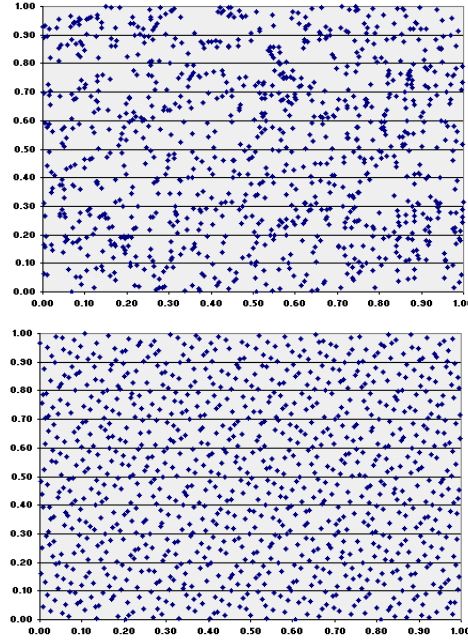


FIGURE 2 – A gauche : points choisis aléatoirement et indépendamment dans $[0; 1]^2$; à droite : premiers points de la suite de Halton pour $b_1 = 2$ et $b_2 = 3$.

Suites de Halton La construction de Halton se base sur les suites de Van der Corput. On se donne b_1, \dots, b_d un ensemble de d entiers premiers entre eux, et le i ème terme de la suite de Halton est le point de $[0; 1]^d$ défini par :

$$x_i = \left(C_i^{(b_1)}, C_i^{(b_2)}, \dots, C_i^{(b_d)} \right)$$

On peut montrer que la suite $\{x_i\}$ est à discrédance faible. L'utilisation des suites de Halton dans une méthode de quasi-Monte Carlo donne de bons résultats pour des valeurs modestes de d . Au delà on a recours à des modifications de cette suite qui ont un meilleur comportement en pratique.

Par ailleurs il existe bien d'autres constructions de suites à discrédance faible : Hammersley, Faure, Sobol, ...

2.2.3 Estimation d'erreur et randomisation

L'inégalité de Koksma-Hlawka (3) n'est pas utilisable pour estimer l'erreur d'approximation en pratique : d'une part, $V(g)$ n'est pas calculable lorsque g est disponible seulement en tant que boîte noire, et d'autre part cette inégalité

est souvent trop pessimiste. Une solution est d'utiliser une méthode de quasi Monte-Carlo randomisée : pour $r = 1, \dots, R$, on calcule des répliques de l'estimation par quasi Monte-Carlo :

$$I^{(r)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i^{(r)})$$

où, pour chaque $r = 1, \dots, R$, $(x_i^{(r)})$ est une suite à discrédance faible, et où, pour chaque $i = 1, \dots, N$, $(x_i^{(r)})$ sont r réalisations aléatoires indépendantes d'une variable aléatoire uniforme dans $[0; 1]^d$. Un choix possible est de prendre :

$$x_i^{(r)} = x'_i + U^{(r)} \mod 1$$

où (x'_i) est une suite (déterministe) à discrédance faible (telle que celle de Halton), et les $(U^{(r)})_r$ sont des réalisations indépendantes d'une loi uniforme sur $[0; 1]^d$.

A partir des R réalisations $I^{(1)}, \dots, I^{(R)}$, on peut construire un intervalle de confiance approché pour $\int g$ de manière similaire à ce qui a été décrit en 2.1.3. On se donne un niveau de risque α , on choisit h^* satisfaisant (1), puis on prend comme intervalle de confiance :

$$[\hat{m} - \hat{s}h_\alpha; \hat{m} + \hat{s}h_\alpha] \quad (5)$$

où :

$$\hat{m} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R I^{(r)}$$

et :

$$\hat{s} = \sqrt{\frac{1}{R} \sum_{r=1}^R (I^{(r)})^2 - (\hat{m})^2}$$

2.3 Produit tensoriel de Smolyak

La construction de Smolyak permet d'utiliser de manière efficace les méthodes de quadrature en dimension 1 pour obtenir une méthode de quadrature en dimension quelconque. C'est donc une alternative aux méthodes de Monte-Carlo et de quasi-Monte Carlo présentées plus haut. Avant de donner cette construction, nous définissons formellement ce qu'est une formule de quadrature ainsi

que la somme et le produit tensoriel de formules de quadrature. Notre référence pour la présentation de la méthode de Smolyak est [11].

Comme pour la section précédente, le but est d'approcher l'intégrale d'une fonction sur l'hypercube unité.

2.3.1 Généralités sur les formules de quadrature

Une formule de quadrature Q en dimension d est la donnée d'une fonction à support fini $\omega_Q : [0; 1]^d \rightarrow \mathbf{R}$ appelée fonction de poids. On appelle support de Q , et on note Γ_Q le support de ω_Q . On note également :

$$Qh = \sum_{x \in \Gamma_Q} \omega_Q(x)h(x)$$

La fonction ω sont en général choisis pour que $Qh \approx \int_{[0;1]^d} h$. Le coût d'évaluation de Qh est quant à lui proportionnel au cardinal de Γ_Q .

Par exemple, en dimension $d = 1$, soit $s \in \mathbf{N}^*$; la méthode des trapèzes à $2^s + 1$ points est donnée par la fonction de poids :

$$\omega(x) = \begin{cases} \frac{1}{2^{s+1}} & \text{si } x \in \{0; 1\} \\ \frac{1}{2^s} & \text{si } x = k/2^s \text{ avec } k = 1, 2, \dots, 2^s - 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Etant données deux formules de quadrature Q et Q' en dimension d et un scalaire $\alpha \in \mathbf{R}$, on définit la combinaison linéaire $Q + \alpha Q'$ comme la formule de quadrature, en dimension d , de fonction de poids $\omega_{Q+\alpha Q'} = \omega_Q + \alpha \omega_{Q'}$. On a ainsi $\Gamma_{Q+\alpha Q'} \subset \Gamma_Q \cup \Gamma_{Q'}$:

$$(Q + \alpha Q')h = Qh + \alpha Q'h$$

pour toute fonction h .

Etant données une formule Q en dimension d et une formule Q' en dimension d' , on définit le produit tensoriel $Q \otimes Q'$ comme la formule de quadrature, en dimension $d + d'$, dont la fonction de poids est : $\omega_{Q \otimes Q'}(x, x') = \omega_Q(x) \times$

$\omega_{Q'}(x')$. On a clairement $\Gamma_{Q \otimes Q'} = \Gamma_Q \times \Gamma_{Q'}$ et :

$$(Q \otimes Q')h = \sum_{x \in \Gamma_Q} \left(\omega_Q(x) \sum_{x' \in \Gamma_{Q'}} \omega_{Q'}(x') h(x, x') \right)$$

de sorte que $(Q \otimes Q')h$ est le résultat de l'application de Q à la fonction $\mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}, x \mapsto Q'(h(x, \cdot))$.

2.3.2 Méthode de Smolyak

Soit maintenant une famille de formules de quadrature $(Q_s)_{s \leq 0}$ en dimension 1. L'indice s désigne le *niveau* de la formule Q_s : on suppose que la taille du support de Q_s croît avec s , de sorte que plus s est élevé, plus le calcul de $Q_s h$ est coûteux, mais plus (pour une famille de méthodes bien choisie) $Q_s h$ est proche de $\int h$.

On peut construire une formule de quadrature $T_s^{(d)}$ en dimension d par tensorisations successives :

$$T_s^{(d)} = \underbrace{Q_s \otimes Q_s \otimes \dots \otimes Q_s}_{d \text{ fois}}$$

Remarquons que le support de $T_s^{(d)} h$ est de taille $N(s)^d$, si $N(s)$ est la taille du support Q_s . Cette taille croît donc très rapidement avec d . La méthode de Smolyak permet de limiter cette croissance. Commençons par réécrire la définition de $T^{(d)}$, par récurrence sur d :

$$T_s^{(d)} = Q_s \otimes T_s^{(d-1)} \quad \forall d = 2, 3, \dots$$

en posant $T_s^{(1)} = Q_s$. Ceci peut se réécrire :

$$T_s^{(d)} = \sum_{p=0}^s (Q_p - Q_{p-1}) \otimes T_s^{(d-1)}$$

en posant $Q_{-1} = 0$. Remplaçons la tensorisation récursive au niveau s par des tensorisations récursives à des niveaux inférieurs, donnant ainsi lieu à la méthode de Smolyak $S_s^{(d)}$ définie par :

$$S_s^{(d)} = \sum_{p=0}^s (Q_p - Q_{p-1}) \otimes S_{s-p}^{(d-1)}$$

et $S_s^{(1)} = Q_s$, en posant $Q_{-1} = 0$.

2.3.3 Méthodes emboîtées et estimation d'erreur

Afin de minimiser la taille du support de $S_s^{(d)}$, on peut chercher à minimiser la taille du support de $Q_p - Q_{p-1}$. Comme celui-ci est inclus dans l'union des supports de Q_p et de Q_{p-1} , il est clair que cette taille est minimale lorsque le support de Q_{p-1} est inclus dans celui de Q_p . Lorsque c'est le cas, on dit que la famille de formules de quadrature $(Q_s)_s$ est emboîtée. La méthode des trapèzes à $2^s + 1$ points présentée en exemple (complétée pour $s = 0$ par la règle du point milieu : $Q_0 h = h(0.5)$) est emboîtée. Les méthodes de Clenshaw-Curtis à $2^s + 1$ points [12, 13] forment également une famille emboîtée, plus performante que la méthode des trapèzes lorsque l'intégrande est lisse ; elle est souvent utilisée comme formule de base pour la méthode de Smolyak. Les méthodes de Gauss [20] ne donnent pas naturellement naissance à des familles emboîtées, il est nécessaire d'utiliser des variantes telles que la méthode de Gauss-Patterson [19].

Un autre avantage des méthodes emboîtées est qu'elles permettent un "raffinement" progressif de l'approximation et une estimation de l'erreur d'intégration. On peut en effet calculer $Q_{s+1}h$ en réutilisant les évaluations de h nécessaires lors du calcul de $Q_s h$; un estimateur (heuristique) d'erreur (donné dans [12]) est $|Q_s h - Q_{s+1} h|$. Ceci peut également s'appliquer aux méthodes de Smolyak construites sur une méthode emboîtée : en effet, une récurrence sur d montre que la famille $(S_s^{(d)})_s$ est emboîtée si $(Q_s)_s$ est emboîtée.

Toujours au sujet de l'estimation d'erreur, [9] utilise une méthode de Smolyak *randomisée*, dont la méthode "de base" est une méthode de quasi Monte-Carlo randomisée en dimension $d' < d$. Différentes estimations $I^{(1)}, \dots, I^{(R)}$ de l'intégrale sont calculées puis un intervalle de confiance approché est fourni à l'aide de (5).

Exemple en dimension 2. Choisissons comme règle de quadrature en dimension 1 la méthode des trapèzes à $2^s + 1$ points donnée en exemple plus haut, complétée par la règle du milieu $Q_0 h = h(0.5)$. On a, pour $s = 3$:

$$S_3^{(2)} = Q_0 \otimes Q_3 + (Q_1 - Q_0) \otimes Q_2 + (Q_2 - Q_1) \otimes Q_1 + (Q_3 - Q_2) \otimes Q_0$$

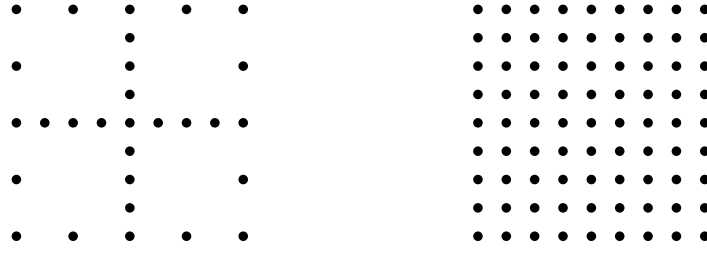


FIGURE 3 – A gauche : le support de $S_3^{(2)}$, contenant 29 points ; à droite : le support de $T_3^{(2)}$, contenant 81 points.

D'où le support de $S_3^{(2)}$:

$$\begin{aligned} \Gamma\left(S_3^{(2)}\right) = & \left\{\frac{1}{2}\right\} \times \left\{0, \frac{1}{8}, \dots, \frac{7}{8}, 1\right\} \cup \left\{0, \frac{1}{2}, 1\right\} \times \left\{0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\right\} \\ & \cup \left\{0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\right\} \times \left\{0, \frac{1}{2}, 1\right\} \cup \left\{0, \frac{1}{8}, \dots, \frac{7}{8}, 1\right\} \times \left\{\frac{1}{2}\right\} \end{aligned}$$

3 Méthodes basées sur la décomposition en polynômes de chaos

3.1 Décomposition en polynômes de chaos

Pour pouvoir présenter la décomposition en polynômes de chaos de Y , nous supposons que le vecteur d'entrées \mathbf{X} peut s'écrire :

$$\mathbf{X} = \phi(\xi_1, \dots, \xi_d) \quad (6)$$

où ξ_1, \dots, ξ_d sont des variables aléatoires indépendantes, suivant toutes une loi normale centrée réduite, et ϕ est une fonction connue, allant de \mathbf{R}^d vers \mathbf{R}^p . Cette reparamétrisation permet d'écrire la sortie Y comme une fonction de $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_d)$:

$$Y(\xi) = Y(\phi(\mathbf{X}))$$

Nous introduisons la famille de polynômes orthogonaux de Hermite $(\psi_n)_n$, tels

que $\deg \psi_n = n$, et

$$\int_{\mathbf{R}} \psi_n(\xi) \psi_m(\xi) w(\xi) d\xi = \begin{cases} 1 & \text{si } n = m \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

pour tous n et m entiers, où la fonction de poids $w(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ est la densité d'une va. normale centrée réduite.

Etant donné un multi-indice $i = (i_1, \dots, i_d) \in \mathbf{N}^d$, on note :

$$\psi_i(\xi) = \psi_{i_1}(\xi_1) \cdots \psi_{i_d}(\xi_d) \quad (7)$$

le polynôme de Hermite à d variables d'ordre i . D'après le théorème de Fubini, ces polynômes satisfont la relation d'orthogonalité :

$$\int_{\mathbf{R}^d} \psi_i(\xi) \psi_j(\xi) w_d(\xi) d\xi = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (8)$$

pour tous multi-indices $i, j \in \mathbf{N}^d$, où $w_d(\xi) = w(\xi_1) \dots w(\xi_d)$ est la densité d'un vecteur aléatoire formé de d va. normales centrées réduites indépendantes. On note \langle, \rangle un produit scalaire pour lequel ces polynômes sont orthogonaux :

$$\langle f, g \rangle = \mathbf{E}(fg) = \int_{\mathbf{R}^d} f(\xi) g(\xi) w_d(\xi) d\xi$$

Comme $Y \in L^2(\Omega)$ est ξ -mesurable, le théorème de Cameron-Martin [6] affirme que Y peut s'écrire sous la forme d'une décomposition en polynômes de chaos (de Hermite) :

$$Y = \sum_{i \in \mathbf{N}^d} y_i^v \psi_i(\xi) \quad (9)$$

pour une collection infinie de réels (y_i^v) appelés coefficients de Y dans sa décomposition en polynômes de chaos, la sommation sur le multi-indice i étant convergente dans L^2 .

L'intérêt de cette décomposition réside dans le fait que $\mathbf{E}(Y)$ et $\text{Var}(Y)$ sont exprimables en fonction de la décomposition en polynômes de chaos de Y . En

effet :

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(Y) &= \int Y(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \\
&= \int Y(\xi) w_d(\xi) d\xi \\
&= \langle Y, 1 \rangle \\
&= \sum_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P} y_i^\vee \langle \psi_i, 1 \rangle
\end{aligned}$$

Or ψ_i est orthogonal aux constantes dès que $i \neq 0$, donc tous les termes de cette somme sont nuls, sauf celui où $i = 0$. Par ailleurs $\psi_0 = 1$, on a ainsi :

$$\mathbf{E}(Y) = y_0^\vee$$

De la même façon, on a :

$$\text{Var}Y = \sum_{i \in \mathbf{N}^d, i \neq 0} (y_i^\vee)^2$$

En pratique, seul un nombre fini de coefficients peuvent être calculés numériquement et stockés, ce qui conduit à la troncature de la série (9) :

$$Y \approx \sum_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P} y_i^\vee \psi_i(\xi)$$

où $P \in \mathbf{N}^*$. Remarquons que cette série contient $\frac{(d+P)!}{d!P!}$ termes.

Une autre approximation à faire en pratique est que les coefficients y_i^\vee ne sont pas connus exactement, mais remplacés par des estimations numériques $y_i \approx y_i^\vee$, donnant lieu à :

$$Y \approx \sum_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P} y_i \psi_i(\xi)$$

et aux approximations "calculables" :

$$\mathbf{E}(Y) \approx y_0 \quad \text{et} \quad \text{Var}Y \approx \sum_{i \in \mathbf{N}^d, 0 < |i| \leq P} (y_i)^2$$

L'erreur lors de l'approximation $\mathbf{E}(Y) \approx y_0$ est donnée exactement par l'erreur $|y_0 - y_0^\vee|$ sur le premier coefficient de la décomposition, et que l'erreur sur l'approximation de $\text{Var}(Y)$ est la somme des erreurs sur les coefficients y_i pour

$0 < |i| \leq P$, et de l'erreur de troncature de la décomposition en polynômes de chaos $\sum_{|i| > P} (y_i^\nu)^2$.

Notre problème revient donc à chercher des méthodes d'approximation des premiers coefficients de la décomposition en polynômes de chaos de Y .

Avant de présenter de telles méthodes, signalons le fait que les variables ξ_i sont normales ne joue pas un rôle crucial. On peut définir des décompositions en polynômes de chaos *généralisés* pour d'autres lois "classiques" qui peuvent avoir un meilleur comportement pratique (c'est à dire, approximer Y aussi bien avec un ordre de troncature P plus faible).

Par exemple, si le vecteur d'entrées \mathbf{X} est formé d'entrées indépendantes uniformes, on peut écrire (6) avec ϕ une fonction affine et des v.a. ξ_1, \dots, ξ_d indépendantes uniformes sur $[-1; 1]$. Il est alors recommandé de considérer des décompositions en polynômes de chaos *de Legendre*, en prenant comme ψ_n les polynômes de Legendre, qui sont orthogonaux pour le poids donné par la densité des ξ_i : $w(x) = \mathbf{1}_{[-1; 1]}(x)$. La décomposition (9) peut encore être généralisée en faisant d'autres choix pour la famille $\{\psi_i\}$: fonctions polynomiales par morceaux, ondelettes...

3.2 Approche par projection

Soit $j \in \mathbb{N}^d$ un multi-indice. En faisant le produit scalaire de Y avec ψ_j , et en utilisant l'égalité (9) ainsi que la propriété d'orthogonalité (8), on a :

$$\langle Y, \psi_j \rangle = y_j^\nu$$

ce qui permet d'exprimer les différents coefficients y_j^ν comme des intégrales :

$$y_j^\nu = \int_{\mathbb{R}^d} Y \psi_j w_d$$

On peut alors utiliser les méthodes de quadrature, telles que celles de la section 2 pour calculer les approximations $y_j \approx y_j^\nu$ de ces coefficients. L'erreur sur les coefficients peut être estimée à l'aide d'un estimateur d'erreur de la méthode de quadrature utilisée.

3.3 Approche par régression

3.3.1 Principe

Dans l'approche par régression, présentée dans [24], on se donne un plan d'expérience $\Xi = \{\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)}\} \subset \mathbf{R}^d$, on calcule les sorties du modèle sur ce plan : $Y(\xi^{(1)}), \dots, Y(\xi^{(N)})$, puis on estime les coefficients de la décomposition en polynômes de chaos tronquée par moindres carrés :

$$(y_i)_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P} = \underset{(\tilde{y}_i)_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P}}{\operatorname{argmin}} \sum_{n=1}^N \left(Y(\xi^{(n)}) - \sum_{|i| \leq P} \tilde{y}_i \psi_i(\xi^{(n)}) \right)^2 \quad (10)$$

Pour que ce problème soit bien posé, la taille du plan d'expérience (N) doit être supérieure ou égale au nombre de coefficients à estimer $((d+P)!/(d! \times P!))$. Lorsque ces deux quantités sont égales, la régression est une interpolation et la méthode porte alors le nom de *collocation*.

Pour le choix du plan d'expérience, [24] contient des stratégies basées sur les racines de polynômes de Hermite. Un plan Monte Carlo par hypercubes latins peut également être utilisé.

Le problème (10) peut également être rendu bien posé lorsque le plan d'expérience contient moins de points que de coefficients à estimer par une méthode de régularisation L^1 ; on peut ainsi amener à résoudre (10) avec la contrainte supplémentaire :

$$\sum_{i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P} |y_i| \leq s \quad (11)$$

où s est un paramètre de régularisation à choisir. Plus s est élevé, et plus les solutions "creuses" (c'est à dire, où beaucoup de y_i estimés sont nuls). Ce problème de moindres carrés contraints peut être résolu à l'aide d'un algorithme *Least Angle Regression* [3].

3.3.2 Indicateurs d'erreur

L'interprétation du problème de recherche des coefficients de la décomposition en polynômes de chaos comme un problème de régression permet d'utiliser les indicateurs d'erreurs standard définis dans ce cadre.

Notons tout d'abord \hat{Y}_Ξ la variable aléatoire prédictrice de Y , définie par :

$$\hat{Y}_\Xi(\xi) = \sum_{|i| \leq P} y_i \psi_i(\xi)$$

où les coefficients y_i satisfont (10) (éventuellement sous la contrainte (11)). Parmi les indicateurs d'erreurs classiques en régression se trouve le *lack-of-fit*, estimé par :

$$\widehat{LOF} = \frac{\sum_{n=1}^N \left(Y(\xi^{(n)}) - \widehat{Y}_{\Xi}(\xi^{(n)}) \right)^2}{\sum_{n=1}^N \left(Y(\xi^{(n)}) - \overline{Y} \right)^2}$$

$$\text{où } \overline{Y} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Y(\xi^{(i)}).$$

Plus \widehat{LOF} est proche de 0, plus l'approximation de Y par \widehat{Y}_{Ξ} est bonne. On définit souvent le complémentaire de \widehat{LOF} appelé R^2 , que l'on peut estimer par $\widehat{R}^2 = 1 - \widehat{LOF}$. Un défaut de ce coefficient est qu'il a tendance à tendre mécaniquement vers 1 lorsque le nombre de coefficients du modèle de régression augmente, malgré le fait que les propriétés prédictives de \widehat{Y}_{Ξ} ne sont pas bonnes (c'est à dire que pour un ξ qui n'est pas dans le plan d'expérience Ξ , $Y(\xi)$ est mal approché par $\widehat{Y}_{\Xi}(\xi)$). Pour pallier cet inconvénient, on peut estimer le R^2 ajusté :

$$\widehat{R}_{adj}^2 = 1 - \frac{N-1}{N-P'-1} \widehat{LOF}$$

où $P' = \frac{(d+P)!}{d!P!}$ est le nombre de coefficients à estimer dans la régression. Ainsi on peut comparer entre eux des modèles ayant un nombre différent de coefficients : les modèles avec beaucoup de degrés de liberté obtiennent un \widehat{LOF} mécaniquement plus élevé mais cet avantage est compensé par la pénalisation par le nombre de coefficients à estimer.

Une autre possibilité est d'utiliser un estimateur *leave-one-out* PRESS (*Predicted REsidual Sum of Squares*) issu des techniques de validation croisée :

$$\widehat{PRESS} = \frac{\sum_{n=1}^N \left(Y(\xi^{(n)}) - \widehat{Y}_{\Xi \setminus \{\xi^{(n)}\}}(\xi^{(n)}) \right)^2}{\sum_{n=1}^N \left(Y(\xi^{(n)}) - \overline{Y} \right)^2}$$

où $\widehat{Y}_{\Xi \setminus \{\xi^{(n)}\}}$ désigne le prédicteur dont les coefficients sont estimés par régression en utilisant le plan d'expérience $\Xi \setminus \{\xi^{(n)}\}$. On teste ainsi la capacité du modèle à prédire la valeur de la sortie en une valeur qui n'a pas été utilisée pour son estimation. Remarquons que [4] donne une formule pour calculer $\widehat{Y}_{\Xi \setminus \{\xi^{(n)}\}}(\xi^{(n)})$ sans avoir à refaire la régression (10).

Ces estimateurs sont utilisés dans [4] afin d'estimer une décomposition creuse en polynômes de chaos, nécessitant l'estimation de moins de coefficients y_i (les

coefficients non estimés étant jugés non significatifs et mis à zéro), et permettant ainsi de diminuer le nombre de sorties du modèle nécessaires.

3.4 Approche Galerkin

Nos références dans cette section sont [14] et [8].

3.4.1 Principe de la méthode

Dans cette section, nous passons dans un cadre où notre sortie est maintenant une *fonction* u . Cette fonction est caractérisée par une EDP qu'elle satisfait ; les paramètres d'entrées aléatoires ξ_1, \dots, ξ_d entrent en jeu dans les coefficients de cette EDP.

Par rapport aux autres méthodes présentées, qui traitaient la sortie comme une boîte noire à laquelle on peut faire des appels pour l'obtenir évaluée pour une certaine valeur des paramètres d'entrées, l'approche Galerkin fait des hypothèses fortes sur le "type" de sortie considérée.

Nous illustrons cette méthode au travers d'un exemple : pour α une variable $L^2(\mathbf{R}^d)$, considérons l'équation, dont l'inconnue, pour tout $\xi \in \mathbf{R}^d$, est une fonction $u(\cdot, \xi) : [0, 1] \rightarrow \mathbf{R}$:

$$\begin{cases} -\alpha(\xi)u''(x; \xi) + u(x; \xi) = 1 & \forall x \in [0, 1], \forall \xi \in \mathbf{R}^d \\ u(0; \xi) = u(1; \xi) = 0 & \forall \xi \in \mathbf{R}^d \end{cases} \quad (12)$$

Introduisons l'espace :

$$X = H_0^1(0, 1) \otimes L^2(\mathbf{R}^d) = \text{Vect}\{(x, \xi) \mapsto g(x)h(\xi) \mid g \in H_0^1(0, 1), h \in L^2(\mathbf{R}^d)\}$$

muni du produit scalaire :

$$\langle u, v \rangle_X = \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) u(x; \xi) v(x; \xi) dx d\xi$$

qui munit X d'une structure d'espace de Hilbert.

Obtention de la forme faible. En prenant le produit scalaire de la première équation de (12) par une fonction quelconque $v \in X$, en effectuant une intégration par parties dans l'intégrale sur $[0, 1]$, et en tenant compte de la condition

de bord (donnée par la deuxième équation de (12)) on obtient la *forme faible* de (12) :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) (\alpha(\xi) u'(x; \xi) v'(x; \xi) + u(x; \xi) v(x; \xi)) dx d\xi \\ = \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) v(x; \xi) dx d\xi \quad \forall v \in X \end{aligned} \quad (13)$$

Supposons maintenant qu'il existe une constante $\alpha_{min} > 0$ telle que $\alpha(\xi) \geq \alpha_{min}$. Le théorème de Lax-Milgram affirme alors l'existence d'une unique $u \in X$ satisfaisant (13).

Discrétisation de la forme faible. Cherchons maintenant u sous la forme de décomposition tronquée en polynômes de chaos :

$$u(x) = \sum_{|i| \leq P} u_i(x) \psi_i(\xi) \quad (14)$$

où les inconnues u_i sont des fonctions de $H^1(0,1)$, qui sont l'analogue des coefficients (scalaires) de la décomposition en polynômes de chaos d'une sortie scalaire. La méthode de Galerkin stochastique consiste à introduire (14) dans la forme faible (12), affaiblie par le remplacement de la condition $\forall v \in X$ par $\forall v \in H_0^1(0,1) \otimes S_P$, où S_P est le sous-espace de $L^2(\mathbf{R}^d)$ de dimension finie, défini par :

$$S_P = \text{Vect}\{\psi_i ; i \in \mathbf{N}^d, |i| \leq P\} \quad (15)$$

On obtient ainsi la version "discrétisée en ξ " de (13) :

$$\begin{aligned} \sum_{|i| \leq P} \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \psi_i(\xi) (\alpha(\xi) u_i'(x) v'(x; \xi) + u_i(x) v(x; \xi)) dx d\xi \\ = \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) v(x; \xi) dx d\xi \quad \forall v \in H_0^1(0,1) \otimes S_P \end{aligned} \quad (16)$$

dont les inconnues sont les fonctions $u_i \in H_0^1(0,1)$.

Or (16) est équivalente à :

$$\begin{aligned}
& \sum_{|i| \leq P} \left(\int_0^1 \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \alpha(\xi) \psi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) u_i'(x) v'(x) dx \right. \\
& \quad \left. + \int_0^1 \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \psi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) u_i(x) v(x) \right) \\
& = \int_0^1 \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) v(x) dx \quad \forall v \in H_0^1(0, 1), \forall k \in \mathbf{N}^d, |k| \leq P \quad (17)
\end{aligned}$$

Car la relation (16) étant linéaire en v , il suffit de la vérifier pour v appartenant à la base $\{v(x) \psi_k(\xi); v \in H_0^1(0, 1), k \in \mathbf{N}^d, |k| \leq P\}$ de $H_0^1(0, 1) \otimes S_P$. L'équation (17) suit alors par l'application du théorème de Fubini. Enfin, (17) se réécrit :

$$\begin{aligned}
& \sum_{|i| \leq P} \int_0^1 \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \alpha(\xi) \psi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) u_i'(x) v'(x) dx + \int_0^1 u_k(x) v(x) \\
& = \mathbf{1}_{k \neq 0} \int_0^1 v(x) dx \quad \forall v \in H_0^1(0, 1), \forall k \in \mathbf{N}^d, |k| \leq P \quad (18)
\end{aligned}$$

en tenant compte des relations d'orthogonalité (8).

On peut alors approcher numériquement les u_i et les cherchant dans un sous-espace V de dimension finie de $H_0^1(0, 1)$, comme solution d'un affaiblissement de (18) où la condition " $\forall v \in H_0^1(0, 1)$ " est remplacée par " $\forall v \in V$ ".

Reste à choisir V . Dans notre exemple, on se donne une subdivision $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = 1$ à $N + 1$ points de $[0; 1]$, et on choisit V défini par :

$$\begin{aligned}
V = \{v : [0; 1] \rightarrow \mathbf{R} \text{ tq. } v \text{ est continue, } v(0) = v(1) = 0 \\
\text{et } \forall j = 0, \dots, N-1 \text{ } v|_{[x_j; x_{j+1}]} \text{ est affine}\}
\end{aligned}$$

dont une base est donnée par $\{\phi_j\}_{j=1, \dots, N-1}$ où ϕ_j est la fonction de V satisfaisant $\phi_j(x_j) = 1$, $\phi_j(x_{j'}) = 0$ si $j \neq j'$.

En écrivant :

$$\forall i \in \mathbf{N}^d \text{ tq. } |i| \leq P, \quad u_i(x) = \sum_{j=1}^{N-1} u_i^j \phi_j(x) \quad \forall x \in [0; 1]$$

on obtient alors le système d'équation vérifié par les $\{u_i^j\}$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N-1} u_i^j \left(\sum_{|i| \leq P} \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \alpha(\xi) \psi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) \int_0^1 \phi_j'(x) v'(x) dx \right) + \sum_{j=1}^{N-1} u_k^j \int_0^1 \phi_j(x) v(x) dx \\ = \mathbf{1}_{k \neq 0} \int_0^1 v(x) dx \quad \forall v \in V, \forall k \in \mathbf{N}^d, |k| \leq P \quad (19) \end{aligned}$$

Comme précédemment, on utilise la linéarité de cette relation devant être vérifiée quelque soit $v \in V$ pour affirmer qu'elle est équivalente à :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N-1} u_i^j \left(\sum_{|i| \leq P} \left(\int_{\mathbf{R}^d} w_d(\xi) \alpha(\xi) \psi_i(\xi) \psi_k(\xi) d\xi \right) \int_0^1 \phi_j'(x) \phi_m'(x) dx \right) + \sum_{j=1}^{N-1} u_k^j \int_0^1 \phi_j(x) \phi_m(x) dx \\ = \mathbf{1}_{k \neq 0} \int_0^1 \phi_m(x) dx \quad \forall m = 1, \dots, N-1, \forall k \in \mathbf{N}^d, |k| \leq P \quad (20) \end{aligned}$$

Cette relation est un système linéaire à $(N-1) \times \frac{(d+P)!}{d!P!}$ équations et autant d'inconnues.

Résumé et discussion. On part donc d'une EDP satisfaite par la sortie u écrite sous forme *faible* (ou *variationnelle*, du type : chercher $u \in \mathcal{F} \otimes L^2(\xi)$ tel que :

$$a(u, v) = f(v) \forall v \in \mathcal{F} \otimes L^2(\xi) \quad (21)$$

où \mathcal{F} est un espace fonctionnel, et a et f sont des formes, respectivement bilinéaire et linéaire sur $F \otimes L^2(\xi)$. Le choix adéquat de F ainsi que l'expression de a et de f dépendent de l'EDP considérée.

Une approximation de la solution de ce problème variationnel peut alors être calculée numériquement comme solution du problème suivant : chercher $u \in \mathcal{F}_d \otimes S_p$ tel que :

$$a(u, v) = f(v) \forall v \in \mathcal{F}_d \otimes S_p \quad (22)$$

où \mathcal{F}_d est un sous-espace de \mathcal{F} de dimension finie, à choisir en fonction du problème, et S_p est le sous-espace de $L^2(\xi)$ défini par (15).

Lorsque v décrit une base B de $\mathcal{F}_d \otimes S_p$, les relations $a(u, v) = f(v)$ forment un système linéaire (creux) de $(\dim F_d) \times (\dim S_p)$ équations dont les coefficients de u dans la base B sont solution. La résolution de ce système linéaire donne

les coefficients de u dans la décomposition en polynômes de chaos.

La méthode de Galerkin a été très étudiée (d’abord dans le contexte de la résolution d’EDP non déterministe), et dispose de techniques d’estimation d’erreur *a priori* (permettant de démontrer dans certains cas la vitesse de convergence de la méthode lorsque le nombre de termes dans la décomposition en polynômes de chaos et la dimension de F_d augmentent, cf. par exemple [8]), et *a posteriori* [2, 16, 17, 23] (permettant d’estimer en pratique l’erreur entre la solution de l’équation continue donnant la sortie du modèle (21) et de l’équation discrétisée (22), traitant ainsi à la fois l’erreur produite par la discrétisation du modèle continu déterministe, l’erreur sur les coefficients de la décomposition en polynômes de chaos, et l’erreur due à la troncature de la décomposition en polynômes de chaos). La vitesse de convergence de ces méthodes est souvent très supérieure à celle que l’on peut observer en utilisant les autres approches données plus haut (projection et régression). Les inconvénients majeurs de cette approche sont : (i) l’écriture de la forme faible et sa discrétisation sont dépendantes du problème, il faut donc avoir accès au modèle mathématique sous-jacent à la sortie et que sa forme se prête à la mise sous forme variationnelle, puis reprogrammer la procédure numérique d’assemblage et de résolution du système donné par (21), et (ii) le système à résoudre est de grande dimension et est en général couplé, ce qui le rend difficile à paralléliser ; à l’inverse les méthodes de projection et de régression sont non intrusives (c’est à dire qu’elles ne nécessitent pas l’accès aux détails mathématiques du modèle), et peuvent être implémentées en faisant des appels (trivialement parallélisables) au code déterministe.

3.4.2 Réduction a priori par GSD

Une technique de réduction de dimension *a priori*, dénommée *Generalized Spectral Decomposition* (GSD) est proposée dans [18] afin de réduire la taille du système (22). L’idée est de reformuler la résolution de ce système comme la résolution d’un problème de minimisation :

$$\min_{u \in F_d \otimes S_p} \frac{1}{2} a(u, u) - f(u)$$

et de relaxer la contrainte $u \in F_d \otimes S_p$ par $u \in A_M$ où A_M est le sous-ensemble de $F_d \otimes S_p$ défini par :

$$A_M = \left\{ u \in F_d \otimes S_p / \exists U_1, \dots, U_M \in F_d, \exists \lambda_1, \dots, \lambda_M \in S_p \text{ tq. } u(x, \xi) = \sum_{m=1}^M U_m(x) \lambda_m(\xi) \right\}$$

où M est un entier donné.

On doit donc chercher les fonctions U_1, \dots, U_M et $\lambda_1, \dots, \lambda_M$, conduisant ainsi à M problèmes de dimension $\dim F_d$ et M problèmes de dimension $\dim S_p$, au lieu d'un problème en dimension $O(\dim F_d \times \dim S_p)$.

Des algorithmes de résolution du problème résultant sont donnés dans [18].

4 Application aux indices de sensibilité

Dans cette section, nous nous intéressons au cas où la sortie est $Y = f(X_1, \dots, X_p)$, avec des variables aléatoires X_1, \dots, X_p supposées *indépendantes*.

Nous sommes intéressés par le calcul approché des indices de sensibilité (principaux, du premier ordre), définis par :

$$S_i = \frac{\text{VarE}(Y|X_i)}{\text{Var}Y} \text{ pour } i = 1, \dots, p$$

4.1 Calcul par quadrature

Nous commençons par exprimer S_i à l'aide d'intégrales par rapport aux lois des X_i . On a :

$$\begin{aligned} \text{VarE}(Y|X_i) &= \mathbf{E} \left(\mathbf{E}(Y|X_i)^2 \right) - \left(\mathbf{E}(\mathbf{E}(Y|X_i)) \right)^2 \\ &= \mathbf{E} \left(\mathbf{E}(Y|X_i)^2 \right) - (\mathbf{E}(Y))^2 \\ &= \int \left(\int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) \right)^2 dP(X_i) - \left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2 \end{aligned}$$

En notant $\mathbf{X}_{\sim i}$ le vecteur :

$$\mathbf{X}_{\sim i} = (X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_p)$$

$dP(\mathbf{X}_{\sim i})$ la loi de $\mathbf{X}_{\sim i}$, donnée par :

$$dP(\mathbf{X}_{\sim i}) = dP(X_1) \cdots dP(X_{i-1}) dP(X_{i+1}) \cdots dP(X_p)$$

et, par abus de notation, $f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) = f(X_1, \dots, X_i, \dots, X_p)$.

La première intégrale peut se réécrire de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \int \left(\int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) \right)^2 &= \int \left(\int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) \right) \times \left(\int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) \right) dP(X_i) \\ &= \int \int \int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) f(X_i, \mathbf{X}'_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}'_{\sim i}) dP(X_i) \end{aligned}$$

(la dernière égalité provenant du théorème de Fubini).

D'où :

$$S_i = \frac{\int \int \int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) f(X_i, \mathbf{X}'_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}'_{\sim i}) dP(X_i) - \left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2}{\int f(\mathbf{X})^2 dP(\mathbf{X}) - \left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2} \quad (23)$$

Sobol [22] de proposer d'approximer par Monte-Carlo les différentes intégrales qui apparaissent dans cette écriture :

$$\begin{aligned} \left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2 &\approx \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j) \right)^2 \\ \int f(\mathbf{X})^2 dP(\mathbf{X}) &\approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j)^2 \\ \int \int \int f(X_i, \mathbf{X}_{\sim i}) f(X_i, \mathbf{X}'_{\sim i}) dP(\mathbf{X}_{\sim i}) dP(\mathbf{X}'_{\sim i}) dP(X_i) &\approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j) f(\mathbf{X}'^j) \end{aligned}$$

où $\{\mathbf{X}^j\}_{j=1, \dots, N}$ est un échantillon iid de la loi de \mathbf{X} , et $\{\mathbf{X}'^j\}_{j=1, \dots, N}$ est un échantillon construit de la façon suivante :

$$\mathbf{X}'^j = \left(\mathbf{X}''^j_1, \dots, \mathbf{X}''^j_{i-1}, \mathbf{X}^j_i, \mathbf{X}''^j_{i+1}, \dots, \mathbf{X}''^j_p \right) \quad (24)$$

pour $j = 1, \dots, N$, et où $\{\mathbf{X}''^j\}_{j=1, \dots, N}$ est un échantillon iid de la loi de \mathbf{X} .

D'après [21], il est conseillé d'approximer le terme $\left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2$ figurant

au numérateur de (23) par :

$$\left(\int f(\mathbf{X}) dP(\mathbf{X}) \right)^2 \approx \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j) \right) \times \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}'^j) \right)$$

ce qui donne lieu à l'estimateur suivant de S_i :

$$\widehat{S}_i \left(\{\mathbf{X}^j\}_{j=1,\dots,N}, \{\mathbf{X}''^j\}_{j=1,\dots,N} \right) = \frac{C(\{\mathbf{X}^j\}_j, \{\mathbf{X}''^j\}) - M(\{\mathbf{X}^j\})M(\{\mathbf{X}''^j\})}{M_2(\{\mathbf{X}^j\}_j) - M(\{\mathbf{X}^j\}_j)^2} \quad (25)$$

où : $\{\mathbf{X}'^j\}$ est construit à partir de $\{\mathbf{X}^j\}$ et $\{\mathbf{X}''^j\}$ suivant (24), et :

$$C(\{\mathbf{X}^j\}, \{\mathbf{X}''^j\}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j) f(\mathbf{X}''^j)$$

$$M(\{\mathbf{X}^j\}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j)$$

$$M_2(\{\mathbf{X}^j\}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{X}^j)^2$$

Les échantillons $\{\mathbf{X}^j\}_j$ et $\{\mathbf{X}''^j\}_j$ peuvent également être choisis à l'aide d'un échantillonnage par hypercubes latins, ou comme points d'une suite à discrepancy faible, éventuellement randomisée ; ces choix sont mentionnés dans [22]. On peut également approcher les intégrales apparaissant dans (23) par une méthode de Smolyak [5].

Estimation d'intervalles de confiance par bootstrap. On peut utiliser une procédure de bootstrap empirique [1, 10] pour estimer l'erreur commise en utilisant l'estimateur (25) au moyen d'intervalles de confiance. Cette procédure est la suivante : on choisit aléatoirement deux échantillons iid $\{\mathbf{X}^j\}_{j=1,\dots,N}$ et $\{\mathbf{X}''^j\}_{j=1,\dots,N}$ de la loi de \mathbf{X} . On calcule alors, pour $r = 1, \dots, R$, la r ème réplique bootstrap de \widehat{S}_i :

$$I^{(r)} = \widehat{S}_i \left(\{\mathbf{X}^j\}_{j \in L_r}, \{\mathbf{X}''^j\}_{j \in L_r} \right)$$

où L_r est une liste de N entiers tirés avec remplacement dans $\{1, \dots, N\}$.

Ces R répliques permettent alors de construire un intervalle de confiance

pour S_i à l'aide de la formule (5) de la section 2.2.3.

4.2 Calcul à partir de la décomposition en polynômes de chaos

Les indices de sensibilité S_i peuvent être calculés grâce à la décomposition en polynômes de chaos de Y . En effet, en reprenant les notations de la section 3, si

$$Y(\xi) = \sum_{j \in \mathbb{N}^d} y_j \psi_j(\xi)$$

(nous omettons les ν en exposant) alors nous avons déjà vu que :

$$\mathbf{E}(Y) = y_0, \quad \text{Var}Y = \sum_{j \in \mathbb{N}^d, j \neq 0} y_j^2$$

De plus on a :

$$\mathbf{E}(Y|\xi_i) = \sum_{j=0}^{+\infty} y_{s(j,i)} \psi_{s(j,i)}(\xi) \quad (26)$$

où

$$s(j, i) = (\underbrace{0, \dots, 0}_{i-1}, j, \underbrace{0, \dots, 0}_{d-i}) \quad (27)$$

est le multi-indice de \mathbb{N}^d contenant j à la i ème place, et 0 aux autres places.

En effet, on a :

$$\mathbf{E}(\psi_j(\xi)|\xi_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } \psi_j \text{ dépend d'une autre variable que } \xi_i \\ \psi_j(\xi) & \text{si } \psi_j \text{ ne dépend que de } \xi_i \end{cases}$$

car le deuxième cas est évident, et, dans le premier cas, par la définition des polynômes de Hermite à d variables (7),

$$\psi_j(\xi) = \Pi_1(\xi_i) \Pi_2(\xi_{\sim i})$$

où Π_1 et Π_2 sont des polynômes de Hermite (respectivement en 1 et $d - 1$ variables), et $\xi_{\sim i} = (\xi_1, \dots, \xi_{i-1}, \xi_{i+1}, \dots, \xi_d)$. On a alors : $\mathbf{E}(\psi_j(\xi)|\xi_i) = \Pi_1(\xi_i) \mathbf{E}(\Pi_2(\xi_{\sim i})) = \Pi_1(\xi_i) \times 0$ car Π_2 étant un polynôme de Hermite non constant (sinon ψ_j ne dépendrait que de ξ_i), il est orthogonal aux constantes. Le résultat (26) suit alors par linéarité de l'espérance conditionnelle, et le fait que ψ_j ne dépend que de ξ_i si et seulement si j est de la forme (27).

On en déduit, par orthonormalité de la famille $\{\psi_j\}_j$:

$$\text{VarE}(Y|\xi_i) = \sum_{j=1}^{+\infty} y_{s(j,i)}^2$$

En pratique on ne connaît que la décomposition tronquée de Y jusqu'à l'ordre P , ce qui donne lieu à l'estimateur de l'indice de sensibilité basé sur la décomposition en polynômes de chaos [7, 24] :

$$S_i \approx \frac{\sum_{j=1}^P y_{s(j,i)}^2}{\sum_{j \in \mathbb{N}^d, 0 < |j| \leq P} y_j^2}$$

Références

- [1] GEB Archer, A. Saltelli, and IM Sobol. Sensitivity measures, ANOVA-like techniques and the use of bootstrap. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 58(2) :99–120, 1997.
- [2] R.E. Bank and R.K. Smith. A posteriori error estimates based on hierarchical bases. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 30(4) :921–935, 1993.
- [3] G. Blatman. *Chaos polynomial creux et adaptatif pour la propagation d'incertitudes et l'analyse de sensibilité*. PhD thesis, Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, 2009.
- [4] G. Blatman and B. Sudret. Efficient computation of global sensitivity indices using sparse polynomial chaos expansions. *Reliability Engineering & System Safety*, 2010.
- [5] G.T. Buzzard and D. Xiu. Variance-based global sensitivity analysis via sparse-grid interpolation and cubature. 2008.
- [6] RH Cameron and WT Martin. The orthogonal development of non-linear functionals in series of Fourier-Hermite functionals. *Annals of Mathematics*, 48(2) :385–392, 1947.
- [7] T. Crestaux et al. Polynomial chaos expansion for sensitivity analysis. *Reliability engineering & System Safety*, 94(7) :1161–1172, 2009.
- [8] M.K. Deb, I.M. Babuka, and J.T. Oden. Solution of stochastic partial differential equations using Galerkin finite element techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(48) :6359–6372, 2001.

- [9] J. Dick, G. Leobacher, and F. Pillichshammer. Randomized Smolyak algorithms based on digital sequences for multivariate integration. *IMA journal of numerical analysis*, 2007.
- [10] B. Efron and R.J. Tibshirani. *An introduction to the bootstrap*. Chapman & Hall/CRC, 1993.
- [11] K. Frank and S. Heinrich. Computing Discrepancies of Smolyak Quadrature Rules. *Journal of Complexity*, 12(4) :287–314, 1996.
- [12] W.M. Gentleman. Implementing Clenshaw-Curtis quadrature, I methodology and experience. *Communications of the ACM*, 15(5) :337–342, 1972.
- [13] W.M. Gentleman. Implementing Clenshaw-Curtis quadrature, II computing the cosine transformation. *Communications of the ACM*, 15(5) :343–346, 1972.
- [14] R.G. Ghanem and P.D. Spanos. *Stochastic finite elements : a spectral approach*. Dover Pubns, 2003.
- [15] P. Glasserman. *Monte Carlo methods in financial engineering*. Springer Verlag, 2004.
- [16] T. Gr "atsch and K.J. Bathe. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis. *Computers & Structures*, 83(4-5) :235–265, 2005.
- [17] L. Mathelin and O.P. Le Maître. Dual-based error analysis for uncertainty quantification in a chemical system. *PAMM*, 7(1) :2010007–2010008, 2007.
- [18] A. Nouy et al. Generalized spectral decomposition for stochastic nonlinear problems. *Journal of Computational Physics*, 228(1) :202–235, 2009.
- [19] TNL Patterson. The Optimum addition of points to quadrature formulae. *Mathematics of Computation*, 22(104) :847–856, 1968.
- [20] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling. Numerical recipes in C : the art of scientific programming. *Cambridge U. Press, Cambridge, England*, 1992.
- [21] A. Saltelli. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. *Computer Physics Communications*, 145(2) :280–297, 2002.
- [22] I.M. Sobol. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Mathematics and Computers in Simulation*, 55(1-3) :271–280, 2001.

- [23] J.R. Stewart and T.J.R. Hughes. A tutorial in elementary finite element error analysis : A systematic presentation of a priori and a posteriori error estimates. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 158(1-2) :1–22, 1998.
- [24] B. Sudret. Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions. *Reliability Engineering & System Safety*, 93(7) :964–979, 2008.